

ной матрицы были использованы сополимеры акриламида с солевыми формами акриловой и метакриловой кислот.

Порошки оксида железа были получены по методом химической конденсации, предложенным В. С. Элмором. Для порошков проведена оценка дисперсности: методом низкотемпературной сорбции азота измерена удельная поверхность, рассчитан эффективный радиус частиц, с помощью электронного микроскопа получены микрофотографии частиц. Введение частиц порошка в полимерную матрицу осуществляли методом свободно-радикальной полимеризации различных мономеров в присутствии частиц оксида железа при постоянном перемешивании и нагревании реакционной системы, и последующим введением сшивающего вещества.

Для полученных гидрогелей определены степень набухания. Изучено явление коллапса магнитных гелей под действием растворов солей, и влияние на него магнитного поля. Полученные результаты обсуждены с точки зрения структурной организации гелей и магнитомеханики частиц оксида железа.

Работа поддержана грантом CRDF № REC-005.

МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЯХ, СОДЕРЖАЩИХ НАНОДИСПЕРСНЫЕ ЧАСТИЦЫ ОКСИДА ЦИРКОНИЯ

Подкорытова Е.П., Терзиян Т.В., Сафронов А.П.

Уральский государственный университет, Екатеринбург

В последнее десятилетие возникла и интенсивно развивается научная область, получившая название нанотехнологии, в рамках которой рассматриваются технологии получения и практического использования дисперсных систем, состоящих из объектов нанометрового размера. Нанотехнологии внедряются в различные сферы науки и техники, модифицируя и оптимизируя традиционные и широко используемые подходы. Так, в технологии получения топливных элементов используется методика нанесения на поверхность электродов сверхтонких пленок оксидных материалов с использованием нанодисперсных порошков этих материалов. Методика включает стадию приготовления сложной пленочной композиции нанопорошка, содержащей в качестве связующего вещество полимерной природы. К этим пленкам предъявляется ряд требований, таких как: однородность распределения частиц, прочность, отсутствие дефектов, высокая гибкость пленки. Вся совокупность этих свойств определяется особенностями взаимодействия на границе фаз полимер – нанопорошок.

Целью данной работы было изучение межмолекулярного взаимодействия нанодисперсных частиц оксида циркония с полимерами: поливинилбутералем, поливинилацетатом и поливиниловым спиртом.

В ходе работы получены пленки полимеров, содержащие различные количества нанопорошка методом полива из раствора. Методом изотермической калориметрии измерены энтальпии растворения композиций в этиловом спирте и воде, с использованием термохимического цикла Гесса рассчитаны энтальпии взаимодействия частиц оксида циркония с полимерными матрицами. Результаты обсуждены с учетом структурных особенностей полимерных матриц и их химической природы. Проведены физико-механические испытания пленок, измерены значения разрывного напряжения.

ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ РАСТЯЖЕНИЯ ПОЛИМЕРНОЙ ГЛОБУЛЫ ЗА КОНЦЫ ЦЕПИ

Долгова Т.Н., Павлов А.С.

Тверской государственный университет

Полимеры представляют собой важный класс веществ, окружающих нас. Благодаря своим необычным свойствам они находят широкое применение в химии, физике, биологии, медицине, технологии, где они используются в элементах памяти и других устройствах цифровой техники. Более того, процессы самосборки белковых молекул лежат в основе процессов жизнедеятельности биологических систем и изучаются уже на протяжении нескольких лет. Однако, несмотря на достигнутые успехи, попытки получения нативной белковой структуры оказались неудачными.

В связи с этим возникла задача – понять механизм самосборки белковых систем путем постепенного растяжения полимерной цепочки из глобулярного состояния за ее концевые атомы. Поэтому нами методом молекулярной динамики смоделированы процессы растяжения простейших гомополимерных и гетерополимерных цепей.

Рассматривалась простейшая свободно-сочлененная цепь с фиксированными длинами связей. Дальние взаимодействия описывались комбинацией потенциалов Леннарда-Джонса и потенциала типа Юкавы. Рассмотрено поведение сравнительно коротких цепей, имеющих длину до 256 звеньев. Величина энергетического параметра потенциала была задана равной $\epsilon=1.0$, приведенная температура $T=1.0$. При этих условиях устойчивой конформацией макромолекулы является глобулярная (система значительно ниже θ точки).